VISIT…

LANZAROTE Caliente.COM

ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2005, том 45, № 10, с. 1837–1847

УДК519.63

ДИАГНОСТИКА ОСОБЕННОСТЕЙ ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ ПРИ РАСЧЕТАХ С КОНТРОЛЕМ ТОЧНОСТИ[1)]

© 2005 г. Е. А. Альшина*, Н. Н. Калиткин*, П. В. Корякин**

(*125047 Москва, Миусская пл., 4а, ИММ РАН;

**103498 Москва, Зеленоград, К-498, МГИЭТ ТУ)

e-mail: alshina@gmx.co.uK

Поступила в редакцию 24.03.2005 г.

Рассмотрен вопрос диагностики особенностей точного решения дифференциальных уравнений при членном интегрировании по наиболее употребленным схемам. Показано, что одностадийная схема Розенброка с комплексным коэффициентом, изначально предложенная для жестких задач, позволяет избежать переполнения счета при расчетах плохо обусловленных задач. Теоретически обоснован и проиллюстрирован на примерах алгоритм, позволяющий диагностировать тип сингулярности и другие особенности точного решения при расчетах этой схемой на сгущающихся сетках. Библ. 9. Фиг. 7. Табл. 2.

Ключевые слова: численное интегрирование, сингулярности, разностные схемы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Предположим, что существует некоторый алгоритм решения определенного класса задач. Предположим так же, что есть конкретная задача, точное решение которой имеет особенность в какой-либо точке. Возникает вопрос: можно ли по результатам работы численного алгоритма понять, в какой точке решение имеет особенность и какого рода эта особенность.

Такая проблема была поставлена в 2003 г. на семинаре академика Г.И. Марчука в Институте вычислительной математики РАН. Тогда был предложен следующий пример: задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (ОДУ)

$$\frac{du}{dt} = u^2, \quad 0 < t, \quad u(0) = u_0 > 0. \tag{1.1}$$

Точное решение выглядит следующим образом:

$$u(t) = u_0/(1 - u_0 t). \tag{1.2}$$

Оно имеет полюс при $t_* = 1/u_0$ и не существует при $t > t_*$.

Будем численно решать задачу (1.1), например, по явной схеме Рунге-Кутты порядка точности $O(\tau)$ с постоянным шагом τ:

$$u_0 = u(0), \quad \hat{u} = u + \tau u^2, \quad n = 0, 1, \ldots, \quad t_n = n\tau.$$

Численное решение положительно, монотонно возрастает и существует при сколько угодно больших t_n. По его виду не возможно сделать вывод о наличии полюса у точного решения. Кажется, что точное решение быстро возрастает и существует при любых $t > 0$. Такое же качественное поведение дают явные схемы Рунге-Кутты более высоких порядков точности.

В данной работе приводит методика диагностики решения на наличие особенностей. Она основана на приеме сгущения сеток и позволяет выявлять не только сингулярности решения, но и более тонкие особенности: например, ограниченность числа непрерывных производных.

[1)] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 05-01-00152, 05-01-00144), Фонда содействия отечественной науке, президентской программы поддержки научных школ (НШ-1918.2003.1) и молодых кандидатов наук (МК-1907.2004.9).

2. РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОДУ

Рассмотрим задачу Коши для системы ОДУ

$$\frac{du}{dt} = F(u, t), \quad u(0) = u_0, \quad 0 \le t. \tag{2.1}$$

Здесь $u(t)$ – неизвестная вектор-функция, а $F(u, t)$ – известная вектор-функция той же размерности.

Для численного интегрирования (2.1) используются различные схемы. Из явных схем наиболее распространены схемы Рунге-Кутты (explicit Runge-Kutta schemes – ERK). Для них легко строятся схемы высокого порядка точности, разработана методика автоматики выбора шага, они просты в реализации и включены в стандартные пакеты математических программ. Здесь мы ограничимся рассмотрением схем ERK до четвертого порядка точности включительно. Формулы для них приведены во всех стандартных учебниках по численным методика (см., например, [1]).

В практически важных расчетах очень часто возникают так называемые жесткие системы. К ним относятся задачи химической кинетики, радиоэлектроники и многие другие. Явные схемы для решения таких задач совершенно неприменимы. Подробный обзор методов интегрирования жестких систем можно найти, например, в [2]. Среди неявных схем стоит отметить однопараметрическое семейство схем Розенброка (ROS). Формулы одностадийной схемы Розенброка для нахождения сеточного решения задачи (2.1) на новом временно́м слое $\hat{u}$ имеют вид (см. [3])

$$u_0 = u(0), \quad \hat{u} = u + \tau \mathrm{Re}k, \quad (E - \alpha\tau\partial F/\partial u)k = F(u, t + 0.5\tau), \tag{2.2}$$

где $\partial F/\partial u$ – матрица Якоби, E – единичная матрица, α – числовой параметр. Таким образом, для перехода на новый временной слой требуется решить систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с матрицей $(E - \alpha\tau\partial F/\partial u)$. Порядок линейной системы равен размерности задачи (2.1). Решение линейной системы в (2.2) следует выполнять прямыми методами, проводят вычисления с максимально доступной разрядностью. При этом переход с исходного временно́го слоя на новый производится за конечное, заранее известное число операций, как в явных схемах. Такие схемы называют явно-неявными.

Для жестких систем необходима, по меньшей мере, A-устойчивость, что достигается при $\alpha \ge 0.5$. Однако $\alpha = 0.5$ приводит к сильной не монотонности, ухудшающей качественное поведение численного решения.

При $\alpha = 1$ получается чисто неявная схема, которую обозначим через ROS1. Она совпадает с обратной схемой Эйлера. Эта схема L1-устойчивая и монотонна, что обеспечивает гораздо лучшее качественное поведение численного решения. Однако ее точность $O(\tau)$ невысока, что препятствует ее широкому применению.

Существует одна комплексная схема (CROS) из семейства (2.2) с $\alpha = (1 + i)/2$. Она была предложена в основополагающей работе [3], но до сих пор остается мало известной, и даже в классических монографиях (см. [1], [2]) отсутствует упоминание о ней. Эта схема обладает уникальными свойствами: точность $O(\tau^2)$, L2-устойчивость (см. [4]), монотонность на линейных задачах, высокая надежность и пригодна для расчета задач с сильной жесткостью. Именно эта схема успешно используется авторами на протяжении многих лет для расчетов самых разнообразных задач, включая системы уравнений в частных производных (см. [4]–[7]). Комплексный параметр входит только в СЛАУ (что не вызывает затруднений), а сами функции остаются функциями вещественного аргумента.

3. СХЕМА CROS ДЛЯ ЗАДАЧ С СИНГУЛЯРНОСТЬЮ

Для систем уравнений возможны случаи особенностей одной, нескольких или всех компонент решения. Логический анализ в этих случаях может оказаться громоздким, поэтому для простоты рассмотрим случай одной переменной.

Пусть вблизи точки t_* функция имеет особенность $u \sim (t_* - t)^{-\beta}$. При $\beta > 0$ это разрыв II рода $u(t_*) = \infty$. При $-1 < \beta < 0$ это корневая особенность и $u'(t_*) = \infty$.

Тогда вблизи особенности u(t) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$du/dt = \beta u^{1 + 1/\beta} \equiv F(u). \tag{3.1}$$

Применительно к (3.1) семейство одностадийных схем Розенброка выглядит следующим образом:

$$\hat{u} - u = \tau \operatorname{Re} k = \tau \operatorname{Re} \frac{\beta u^{1+1/\beta}}{1 - \tau\alpha(\beta+1)u^{1/\beta}}. \quad (3.2)$$

При использовании схемы CROS с $\alpha = (1 + i)/2$ (3.2) принимает вид

$$\hat{u} - u = \tau\beta u^{1+1/\beta} \frac{1 - \tau 0.5(\beta+1)u^{1/\beta}}{[1 - \tau 0.5(\beta+1)u^{1/\beta}]^2 + [\tau 0.5(\beta+1)u^{1/\beta}]^2}. \quad (3.3)$$

Из вида (3.3) следуют несколько легко доказываемых утверждений

Утверждение 1. *Существует значение* $u_* = [2/\tau(\beta + 1)]$, *при котором численное решение схемы* CROS *не меняется при переходе на следующий временной слой* $\hat{u}$: $\hat{u} = u_*$.

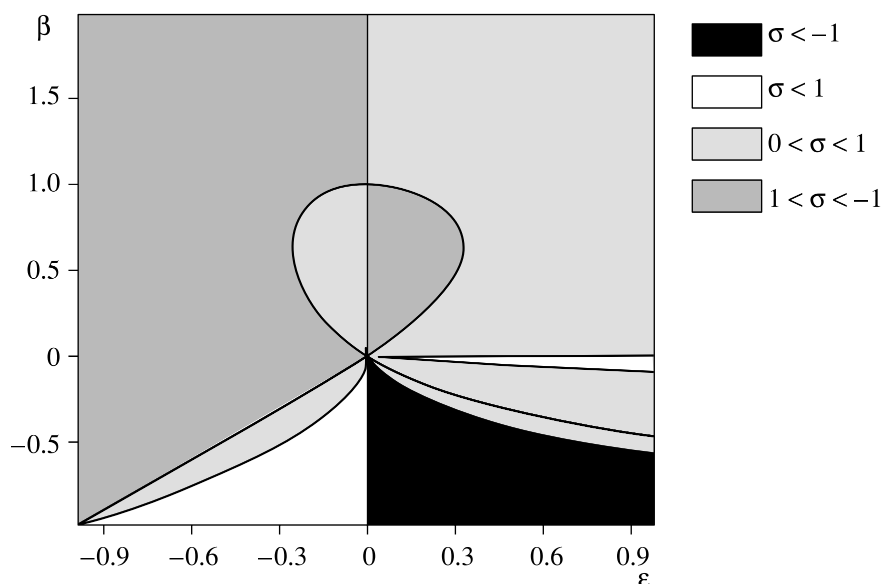
Утверждение 2 (свойство притяжения). *При* $\hat{u} > u_*$ *приращение функции* $\hat{u} - u < 0$ *и, наоборот, при* $u < u_*$ *приращение функции* $\hat{u} - u > 0$; *т.е. при любом значении* u *на текущем временно́м слое следующий шаг схема* CROS *делает по напряжению к положению равновесия* $u_* = [2/\tau(\beta + 1)]^\beta$.

Выясним условия устойчивости этого положения равновесия схемы CROS. Пусть на очередном временно́м слое численное решение $u = u_*(1 + \varepsilon)$, т.е. его относительное отличие от u_* составляет ε. На следующем временно́м слое $\hat{u} = u_*(1 + \hat{\varepsilon})$, т.е. отличие оставит $\hat{\varepsilon}$. Положение равновесия u_* будет устойчиво, если $|\hat{\varepsilon}| < |\varepsilon|$.

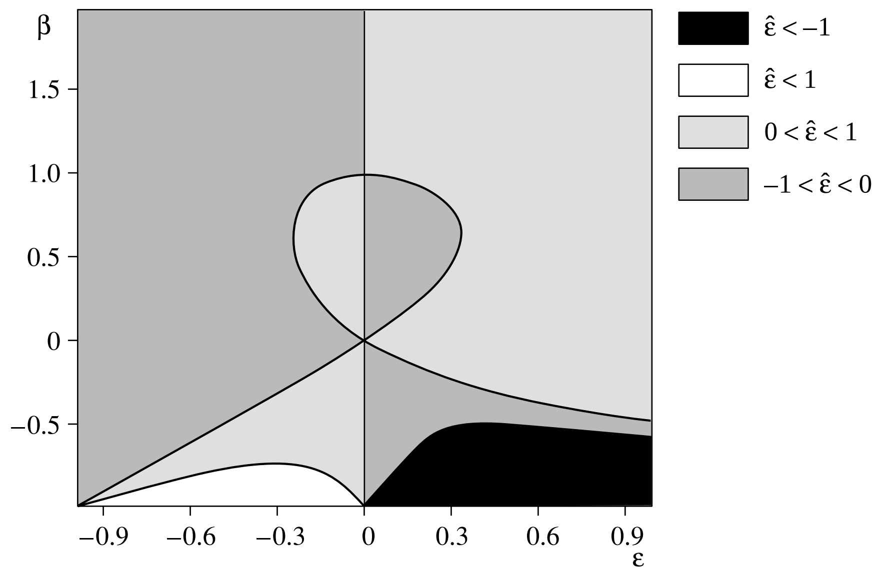
Из (3.3) следует, что

$$\hat{\varepsilon} - \varepsilon = \frac{2\beta}{(\beta+1)}(1+\varepsilon)^{1+1/\beta} \frac{1 - (1+\varepsilon)^{1/\beta}}{[1 - (1+\varepsilon)^{1/\beta}] + (1+\varepsilon)^{2/\beta}}. \quad (3.4)$$

На фиг. 1 показана величина $\sigma = \hat{\varepsilon}(\varepsilon, \beta)/|\varepsilon|$. Области серого цвета на фигуре показывают зоны, в которых (3.4) осуществляет сжимающее отображение. Видно, что при $\beta \ge 1$ численное решение u стремится к своему предельному значению u монотонно. При $0 < \beta < 1$ вблизи u_* возможна не монотонность (смена знака σ), но каждое следующее значение $\hat{u}$ лежит ближе к u_*, чем пре-



Фиг. 1.



Фиг. 2.

дыдущее ($|\hat{\varepsilon}| < |\varepsilon|$). При $-1 \le \beta < 0$ вблизи положения равновесия u_* расположены зоны "неустойчивости" (белая и черная области на фиг. 1), когда u может оказаться дальше от u_*, чем $u(|\hat{\varepsilon}| < |\varepsilon|)$. Численное решение стабилизируются в полосе вокруг u_*, ширина которой равна расстоянию до зоны "устойчивости" (области серого цвета на фиг. 1). Границы этой полосы, вообще говоря, не симметричны относительно u_*. При $-0.5 < \beta < 0$ амплитуда колебаний численного решения u вокруг положения равновесия не превосходит u_*.

Рассмотрим $\hat{\varepsilon}(\varepsilon, \beta)$ – относительное уклонение $\hat{u}$ от u_*. Оно приведено на фиг. 2. Видно, что при $-1 < \beta < -0.5$ всегда существует ситуация, когда $\hat{\varepsilon} < -1$ (черная зона на фиг. 2). При этом u отрицательно, и дальнейшие вычисления правой части в (3.1) невозможны (возникает многозначная функция). При $-1 < \beta < -0.5$ ширина полосы, в которой стабилизируется численно решение, такова, что $\hat{u}$ принимает отрицательные значения, что неадекватно с точки зрения точного решения $u_{\text{exact}}(t) \ge 0$ и приводит к возникновению многозначной функции в правой части (3.1). Этот случай требует осторожности при написании программ.

Таким образом, справедливо

Утверждение 3. *При особенности точного решения ОДУ типа полюса* $\beta > 0$ *численное решение схемы* CROS *стремится к пределу* u_*. *При особенности типа корня* $-1 \le \beta < 0$ *численное решение схемы* CROS *стабилизируется в полосе вокруг положения равновесия* u_*.

Пусть вблизи точки t_* точное решение имеет не степенную, а логарифмическую особенность $u \sim \ln(t_* - t)$. Тогда вблизи сингулярности функция удовлетворяет ОДУ

$$du/dt = -e^{-u} \equiv F(u). \tag{3.5}$$

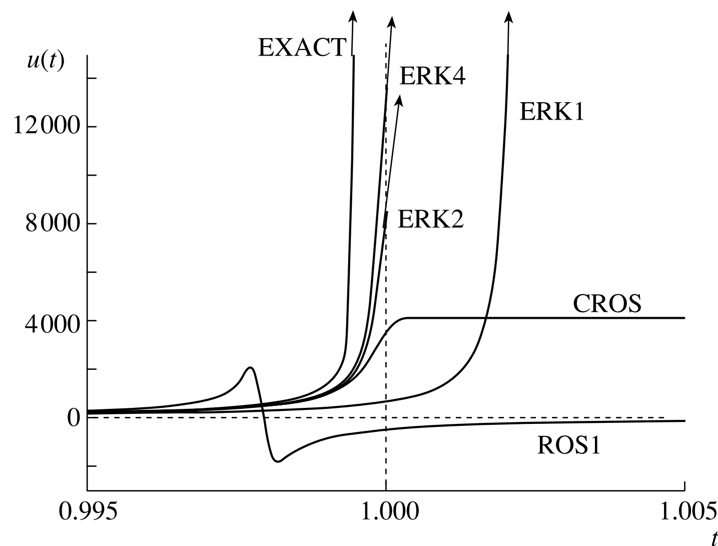
Применительно к этому уравнению схема CROS дает

$$\frac{\hat{u} - u}{\tau} = -e^{-u}\frac{1 - \tau 0.5e^{-u}}{(1 - \tau 0.5e^{-u})^2 + (\tau 0.5e^{-u})^2},$$

откуда следует

Утверждение 4. *Существует положение равновесия* $u_* = \ln\tau - \ln 2$, *при котором численное решение схемы* CROS *не меняется при переходе на следующий временно́й слой.*

Утверждение 5. *При* $u > u_*$ *приращение функции* $\hat{u} - u < 0$ *и, наоборот, при* $u < u_*$ *приращение функции* $\hat{u} - u < 0$ *и, наоборот, при* $u < u_*$ *приращение функции* $\hat{u} - u > 0$.



Фиг. 3.

Рассуждая аналогично случаю степенной особенности, можно сформулировать

Утверждение 6. *В случае логарифмической особенности положение равновесия* $u_* = \ln\tau - \ln 2$ *схемы* CROS *асимптотически устойчиво.*

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ЗАДАЧ С СИНГУЛЯРНОСТЬЮ

Качественное поведение численного решения вблизи сингулярности существенно отличается для явных (ERK) и неявных (ROS) схем. Для особенности типа полюса $\beta > 0$ все схемы семейства ERK дают монотонно возрастающее решение. Рост численного решения тем стремительнее, чем выше порядок точности схемы. Вскоре после прохождения точки t_*, в которой точное решение имеет полюс, наступает переполнение в расчетах и дальнейший счет невозможен. Такое качественное поведение решения неприятно, потому что пользователю трудно разобрать истинную причину переполнения. На фиг. 3 показаны результаты расчетов задачи (3.1) с начальным условием $u_0 = 1$ по схемам ERK и ROS для $\beta = 1$ и $t_* = 1$. В приведенном расчете шаг сетки $\tau \approx 0.0002$. Штриховыми линиями показаны $u = 0$ и асимптота точного решения $t = t_*$. Видно, что кривые численного решения для всех схем ERK пересекают асимптоту точного решения.

Для неявных схем картина другая. Сначала решение схемы ROS1 растет, но еще до полюса оно срывается в область отрицательных значений. Вычисления правой части (3.1) при этом возможны лишь для $\beta = 1$, иначе возникает возведение отрицательного числа в дробную степень.

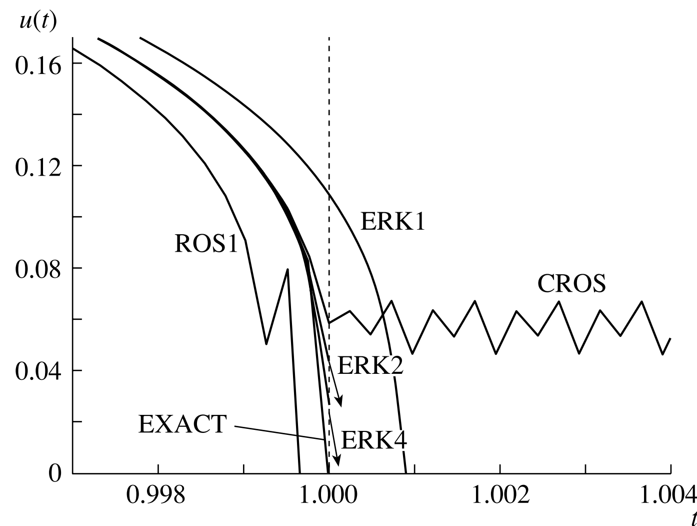
При расчетах схемой CROS численное решение монотонно растет до полюса и стабилизируется на постоянном значении после его прохождения. Высота “полочки” тем выше, чем мельче шаг сетки. В случае использования CROS переполнения не наступает и возможно не только установить момент сингулярности точного решения, но и диагностировать тип сингулярности по зависимости $u_*(\tau)$.

Аналогичное качественное поведение дают ERK и ROS схемы вблизи логарифмической особенности: решение по схеме CROS стабилизируется (не монотонно) на уровне u_*, для ROS1 вблизи особенности характерна смена знака численного решения, расчет по схемам ERK приводит к переполнению вскоре после t_*.

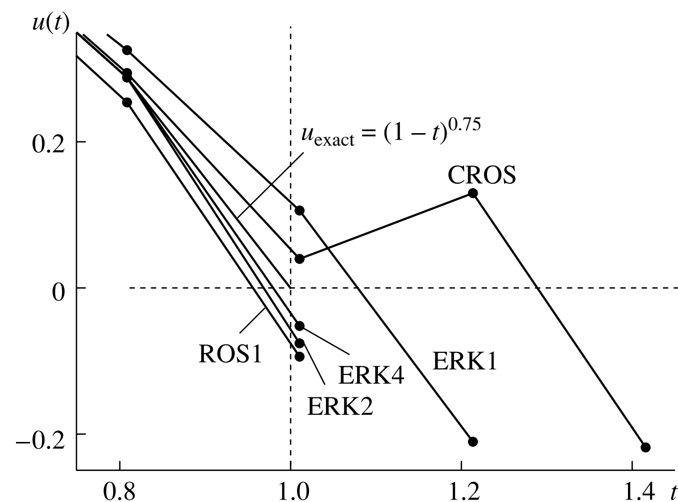
Численное решение для ERK и ROS схем вблизи корневой особенности показано на фиг. 4. Результаты расчета приведены для $\beta = -0.3$ и $t_* = 1$. Штриховая линия – асимптота точного решения $t = t_*$. В приведенном расчете шаг сетки $\tau \approx 0.0005$.

Численное решение по явным схемам ERK пересекают асимптоту при $u > 0$ и практики сразу за особенностью t_* расчет срывается в область отрицательных значений.

Численное решение схемы CROS стабилизируется в полосе вокруг u_*, границы полосы не симметричны относительно положения равновесия u_*. Численное решение схемы ROS1 срыва-



Фиг. 4.

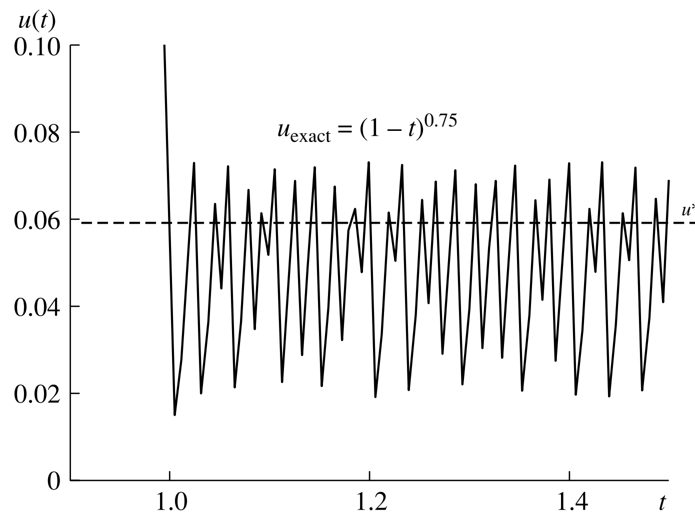


Фиг. 5.

ется в область отрицательных значений и дальнейшие вычисления невозможны. Иногда этому срыву предшествуют резкие скачки решения в области положительных значений, что также не соответствует качественному поведению точного решения.

При корневой особенности с параметром $-1 < \beta < -0.5$ численное решение схем ERK и ROS1 монотонно убывает и срывается область отрицательных значений. При использовании схемы CROS также возникают отрицательное значения численного решения, но до этого решение успевает сделать несколько колебаний вокруг положения равновесия $u_* > 0$; число этих колебаний тем больше, чем мельче шаг сетки. Это и позволяет на практике определить зависимость $u_*(\tau)$. Далее будет показано, как эта зависимость используется для диагностики β. На фиг. 5 приведены результаты расчета для $\beta = -0.75$ и $t_* = 1$. Штриховыми линиями показаны $u = 0$ и асимптота точного решения $t = t_*$. В приведенном расчете шаг сетки $\tau \approx 0.2$.

Предлагаемый ниже алгоритм диагностики типа сингулярности основан на контроле за величиной $u_*(\tau)$. Так как положение равновесия схемы CROS не всегда достигается монотонно или даже численное решение стабилизируется в полосе вокруг u_*, то для определения u_* используем утверждение 2 (свойство притяжения), согласно которому u_* лежит ниже самого низкого локального максимума, но выше самого высокого локального минимума. Алгоритм выбора u_* в



Фиг. 6.

достаточно сложном случае иллюстрирует фиг. 6; т.е. в случае, когда численное решение стабилизируется в некоторой полосе вокруг u_*, значение u_* можно выразить формулой

$$u_0 = \{\min[\max_{\text{loc}}(u(t))] + \max[\min_{\text{loc}}(u(t))]\}/2.$$

Стоит заметить, что в случае $-1 < \beta < -0.5$ решение делает лишь несколько колебаний вокруг u_* и затем счет разваливается, как это было показано выше. При этом методика определения u_* остается той же, но точность становится хуже. Тем не менее, мы гарантированно сможет определить тип особенности, но значение β получим лишь с невысокой точностью. Для более точного определения значения β следует делать мельче шаг сетки.

5. ДИАГНОСТИКА СИНГУЛЯРНОСТИ ПРИ РАСЧЕТАХ С КОНТРОЛЕМ ТОЧНОСТИ

5.1. Сгущение сетки

Контроль точности численного решения методом сгущения сеток предложен еще Ричардсоном в 1927 г. Современное состояние этого метода подробно изложено в [8]. Применение метода Ричардсона возможно не только на равномерных сетках, но и на так называемых квазиравномерных сетках (см. [9]). Суть метода в том, что погрешность численного решения для достаточно гладких функций представима суммой

$$\Delta = \sum_{m=p} c_m N^{-m} \tag{5.1}$$

по обратным степеням числа узлов сетки. Верхний предел этой суммы зависит от гладкости решения. По результатам расчетов на двух сетках с числом узлов N и rN погрешность численного решения $\Delta^{(rN)}(r)$ в совпадающих узлах t этих сеток может быть вычислена по формуле

$$\Delta^{(rN)}(t) = \frac{u^{(rN)} - u^{(N)}}{r^p - 1} + o(N^{-p}), \tag{5.2}$$

где p – теоретический порядок точности схемы. Оценка (5.2) асимптотически точна при $N \longrightarrow \infty$ для функций, имеющих необходимое число непрерывных ограниченных производных. По результатам расчетов на трех соседних сетках с числом узлов N, rN, r^2N можно вычислить эффективный порядок точности схемы

$$p^{\text{eff}}(t) = \frac{\ln\Delta^{(N)} - \ln\Delta(rN)}{\ln r}. \tag{5.3}$$

При сгущении сетки имеем $p^{\text{eff}} \longrightarrow p$ для достаточно гладких решений. Например, схема CROS реализует свой теоретический порядок точности для непрерывно дифференцируемых функций с ограниченной второй производной. Если само решение либо его производная обращаются в бесконечность, то, как следует из утверждений 1–6, существует положение равновесия численного решения схемы CROS u_*. Используя величину $u_*(\tau)$ для определения эффективного порядка точности схемы CROS при $t \ge t$, получаем

Утверждение 7. *При наличии сингулярности точного решения типа* $u(t) \sim (t_* - t)^{-\beta}$ *в узлах* $t \ge t_*$ *эффективный порядок точности схемы* CROS *имеет вид* $p^{\text{eff}} \longrightarrow -\beta$ *при* $\tau \sim N^{-1} \longrightarrow 0$.

Утверждение 8. *При наличии сингулярности точного решения типа* $u(t) \sim \ln(t_* - t)$ *в узлах* $t \ge t_*$ *погрешность схемы* CROS *имеет вид* $\Delta^{(N)}(t) = -\dfrac{\ln r}{r^p - 1} + o(N^{-p})$ *и* $p^{\text{eff}} \longrightarrow 0$ *при* $\tau \sim N^{-1} \longrightarrow 0$.

5.2. Разрывы производных

Несовпадение эффективного и теоретического порядков точности схемы свидетельствует о недостаточной гладкости функции. Например, схемам, имеющим аппроксимацию $O(\tau^2)$, для реализации своего теоретического порядка точности необходима непрерывная вторая производная точного решения.

Учет асимптотически точной оценки погрешности (5.2) в качестве поправки

$$\tilde{u}^{(rN)}(t) = u^{(rN)}(t) + \Delta^{(rN)}(t)$$

равносилен исключению главного члена в разложении (5.1) ошибки по обратным степеням N. Эффективный порядок точности при этом возрастает на 1 (а для симметрично написанных схем даже на 2). Для схемы CROS, например, первое уточнение дает точность $O(N^{-3})$ при наличии непрерывной $u'''(t)$.

Грамотная организация расчетов с гарантированной точностью на сгущающихся сетках должна осуществляться с контролем и погрешности, и эффективного порядка точности в узлах начальной сетки. По тому, как ведет себя эффективный порядок точности при увеличении числа узлов, можно судить о степени гладкости и наличии сингулярности у точного решения.

5.3. Алгоритм диагностики особенностей при расчетах схемой CROS

На основе утверждений 1–8 построим алгоритм диагностики типа сингулярности при расчетах схемой CROS на сгущающихся сетках. Будем вести расчет, используя семейство равномерных или квазиравномерных сеток $\{t_n\}$. При сгущении в целое число раз r узлы стартовой сетки являются узлами всех более густых сеток, в этих точках и будем контролировать погрешность численного решения, используя асимптотически точную оценку (5.2). По расчетам на трех соседних сетках будем вычислять эффективный порядок точности p^{eff} в контрольных точках. Если при сгущении сетки имеет место $p^{\text{eff}} \longrightarrow p = 2$, то оценке погрешности (5.2) можно доверять и расчет на сгущающихся сетках прекращается, когда во всех контрольных точках достигнута требуемая точность.

Если, начиная с какой-либо контрольной точки теоретический порядок точности не реализуется, т.е. $p^{\text{eff}} \longrightarrow p$, то это говорит о нарушение гладкости. При $p^{\text{eff}} \longrightarrow 1$ неограниченна $u''(t)$. При $0 < p^{\text{eff}} < 1$ точное решение задачи имеет особенность типа корня $u(t) \sim (t_* - t)^{-\beta}$, $-1 < \beta < 0$, причем предельное значение имеет вид $p^{\text{eff}} = -\beta$. При $p^{\text{eff}} < 0$ точное решение имеет разрыв второго рода, т.е. $u(t) \sim (t_* - t)^{-\beta}$, $\beta > 0$ и также можно определить степень β по предельному значению $p^{\text{eff}} = -\beta$.

Разрывы даже высоких производных точного решения можно установить, используя рекуррентное уточнение. Если эффективный порядок точности один раз уточненного решения схемы CROS имеет вид $\tilde{p}^{\text{eff}} \longrightarrow 3$, то $u'''(t)$ непрерывна. В этом случае можно в качестве результата расчета выдавать пользователю уточненное решение. Требуемый уровень точности при этом достигается при гораздо меньшем числе узлов сетки N, что способствует написанию экономичных алгоритмов. Если эффективный порядок точности один раз уточненного решения схемы CROS имеет вид $\tilde{p}^{\text{eff}} < 3$, то $u'''(t)$ неограниченна. Для диагностики разрывов более высоких производных требуется большее число уточнений.

Место положение особенности определяется с точностью шага стартовой сетки: чем точнее его нужно определить, тем гуще нужно выбирать стартовую сетку. Можно также усложнить логику программы: при каждом сгущении сетки рассматривать предыдущую сетку как стартовую.

5.4. Тест

Проиллюстрируем данный алгоритм результатами расчетов следующей задачи Коши:

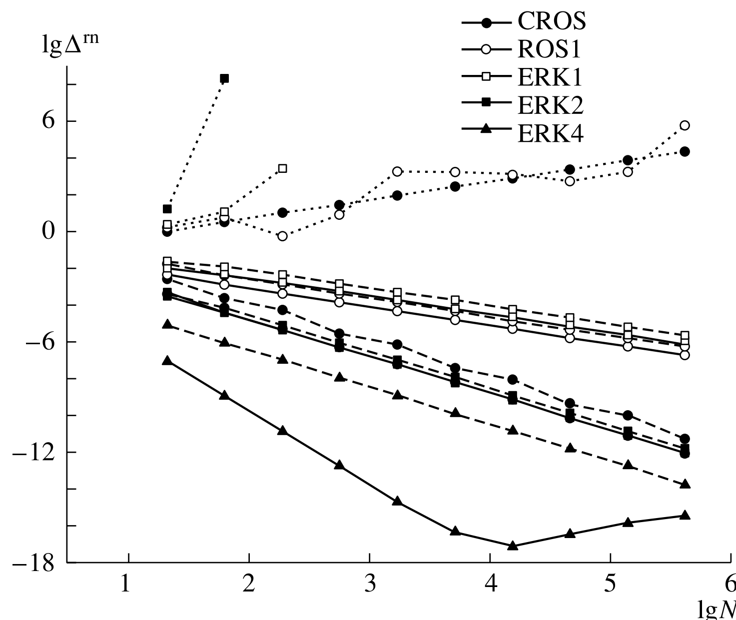
$$\frac{du}{dt} = F(u) = \begin{cases} u, & 0 \le u \le 1, \\ u^{1+1/\beta}, & u > 1, \end{cases} \tag{5.4}$$

$u(0) = u_0, \quad 0 < u_0 < 1, \quad t \ge 0.$

Точное решение задачи (5.4) с начало гладко: $u(t) = u_0 e^t$, $0 \le t < t_0 = -\ln u_0$. В точке t_0 имеет конечный скачок функции $u''(t)$. При $t_0 \le t \le t_*$ точное решение задачи (5.4) имеет вид $u(t) = \mathrm{const}(t_* - t)^{-\beta}$. Если $\beta > 0$, то $u(t_*) = \infty$. Если $-1 < \beta < 0$, то $u(t_*)$ конечно, но $u'(t_*) = \infty$. Для $t > t_*$ точного решения задачи (5.4) не существует. Таким образом, тестовое решение имеет две разные по типу особенности.

Если особенность типа разрыва высокой производной являлась бы узлом сетки, то ни одна схема этого не почувствовала бы, так как область интегрирования ДУ просто разбивается на две подобласти, в каждой из которых гладкость точного решения не нарушается. Поэтому была выбрана равномерная начальная сетка с шагом $\tau = 2/9$ и числом шагов $N = 7$. При этом последний узел сетки лежит за полюсом. Сгущение сетки проводилось в $r = 3$ раза, очевидно, узлы начальной сетки являются узлами всех более густых сеток, в этих точках и контролировалась погрешность. При таком расположении узлов точки t_0 и t_* не являлись узлами сетки ни при каком N. Выбранные параметры стартовой сетки τ и N наиболее просты для понимания и наглядны. На практике для надежной диагностики разрывов высоких производных целесообразно выбирать шаг стартовой сетки иррациональным числом, тогда при сгущении в целое число раз r вероятность попадания точки нарушения гладкости в узел сетки практически равна нулю.

На фиг. 7 показана асимптотически точная оценка погрешности $\Delta^{(rN)}$ в зависимости от числа узлов сетки N в двойном логарифмическом масштабе. Данные приведены для точек $t = 4/9$ (до всех особенностей, сплошные линии), $t = 6/9$ (после разрыва второй производной точного решения, штриховые линии) и $t = 14/9$ (за полюсом, пунктирные линии). Графики асимптотически близки к прямым, угол наклона которых соответствует эффективному порядку точности чис-



Фиг. 7.

Таблица 1

lg$N$	ROS1			CROS			ERK1			ERK2			ERK4		
	4/9	6/9	14/9	4/9	6/9	14/9	4/9	5/9	14/9	4/9	5/9	14/9	4/9	5/9	14/9
1.8	1.16	1.43	–1.04	2.11	2.31	–1.00	0.97	0.94	–1.43	1.95	1.95	–14.86	3.89	2.01	–
2.28	1.05	1.00	2.12	2.04	1.31	–1.00	0.98	0.95	–4.93	1.97	2.05	–	3.96	1.97	–
2.75	1.02	1.05	–2.50	2.01	2.65	–1.00	0.98	0.95	–	1.99	1.96	–	3.99	2.01	–
3.23	1.01	1.00	–4.82	2.00	1.99	–1.00	0.99	0.99	–	2.00	2.01	–	4.01	2.00	–
3.71	1.00	1.00	0.08	2.00	1.98	–1.00	0.99	0.99	–	2.00	2.00	–	3.51	2.00	–
4.18	1.00	1.00	0.26	2.00	1.99	–1.00	1.00	1.00	–	2.00	2.00	–	–	2.00	–
4.66	1.00	1.00	0.62	2.00	1.98	–1.00	1.00	1.00	–	2.00	2.00	–	–	2.00	–
5.14	1.00	1.00	–0.98	2.00	1.99	–1.00	1.00	1.00	–	2.00	2.00	–	–	2.00	–
5.62	1.00	1.00	–5.30	2.00	1.96	–1.00	1.00	1.00	–	2.00	2.00	–	–	2.02	–

Таблица 2

Интервал	CROS	ERK2
$0 < t \le t_0$	3.03 ± 0.04	2.99 ± 0.04
$t_0 < t < t_*$	2.00 ± 0.06	1.58 ± 0.63
$t \ge t_*$	-1.00 ± 0.00	

ленного решения в данной точке. Расчет по ERK4 выходит на ошибки округления при $N \approx 10^4$, так что далее погрешность уже не уменьшается.

В табл. 1 приведен эффективный порядок точности рассмотренных схем в трех контрольных точках $t = 4/9$, $t = 6/9$ и $t = 14/9$. Числа p^{eff} стабилизируются при $N \ge 150$. До сингулярности эффективный порядок точности равен теоретическому. За полюсом t_* эффективный порядок точности схемы CROS согласно утверждению 7 в точности диагностирует порядок полюса. Эффективный порядок точности схемы ROS1 за полюсом хаотически меняется в широких пределах; в практике вычислений с контролем точности это означает, что доверять результатам такого расчета не следует. Для явных схем ERK вычислить эффективный порядок точности за особенностью типа полюса практически невозможно, так как при больших N быстро наступает переполнение в расчетах (то же относится к корневой особенности).

Всем упомянутым схемам, кроме ERK4, для реализации своего теоретического порядка точности достаточно непрерывной дифференцируемости точного решения и ограниченности его второй производной. Поэтому разрыв функции $u''(t_0)$ диагностируется лишь схемой ERK4: после точки t_0 эффективный порядок точности ERK4 падает до 2.

Однако диагностика разрыва высокой производной точного решения возможна и при использовании схем невысокого порядка точности. Первое рекуррентное уточнение для схем второго порядка точности повышает точность до $O(N^{-3})$ на гладких решениях. После точки t_0 число непрерывных производных у функции уже недостаточно и рекуррентное уточнение не повышает порядка точности. В табл. 2 показан эффективный порядок точности уточненного решения для схем CROS и ERK2. До точки t_0 точность $O(N^{-3})$, в интервале $t_0 < t < t_*$ точность исходной схемы $O(N^{-2})$ и рекуррентным уточнением повысить не удается.

Проведены многочисленные тесты с различным расположением узлов сетки относительно особенности и различными типами сингулярности. Все они показали надежность диагностики разрывов высоких производных и определения типа сингулярности расчетами на сгущающихся сетках на основе утверждений 1–8. Все сказанное подтверждает преимущества использования схемы CROS не только для жестких, но и для плохо обусловленных задач. На основе именно этой схемы целесообразно составлять программы расчетов с асимптотически точной оценкой погрешности и диагностикой сингулярности.

Заметим, что сейчас наиболее распространены программы решения ОДУ с автоматическим выбором шага (что по существу является построением адаптивной сетки (см. [1]–[2]). Однако для таких алгоритмов не найдено способа получения асимптотически точных оценок погрешности,

поэтому они непригодны для диагностики особенности решения и расчетов с гарантированным контролем точности. Пока такую возможность дает только метод сгущения равномерных и квазиравномерных сеток.

Авторы выражают благодарность А.Г. Свешникову за постоянное внимание к работам по разработке методики расчетов с гарантированной точностью, поддержку идеологии и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хайрер Э*. Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
2. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
3. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Comput. J. 1963. V. 5. № 4. P. 329–330.
4. *Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Интегрирования жестких систем дифференциальных уравнений: Препринты ИПМ М.: 1981. № 80 и № 90.
5. *Днестровская Е.Ю., Калиткин Н.Н., Ритус И.В.* Решение уравнений в частных производных схемами с комплексными коэффициентами // Матем. моделирование. 1991. Т. 3. № 9. С. 114–127.
6. *Гужев Д.С., Калиткин Н.Н.* Уравнение Бюргерса – тест для численных методов // Матем. моделирование. 1995. Т. 7. № 4. С. 99–127.
7. *Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В.* Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
8. *Марчук Г.И., Шайдуров В.В.* Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
9. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. М.: Наука, 1978.